

# PATENT ABSTRACTS OF JAPAN

(11)Publication number : 10-055348

(43)Date of publication of application : 24.02.1998

(51)Int.Cl.

G06F 15/18  
G06F 15/18  
G06F 17/50  
// G06F 17/00

(21)Application number : 08-225863

(71)Applicant : BRIDGESTONE CORP

(22)Date of filing : 08.08.1996

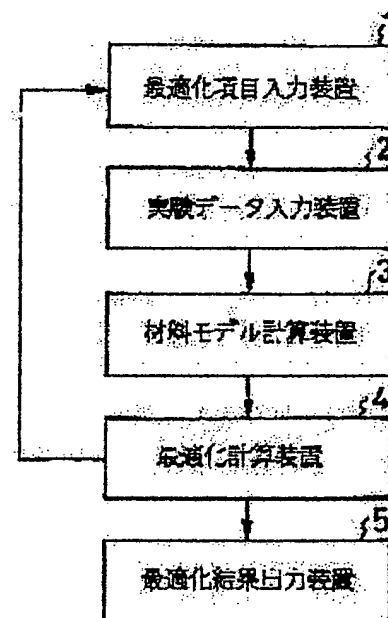
(72)Inventor : NAKAJIMA YUKIO

## (54) DEVICE AND METHOD FOR OPTIMIZED ANALYSIS OF MULTICOMPONENT MATERIAL

(57)Abstract

**PROBLEM TO BE SOLVED:** To enable an effective optimum material designing by generating a precise material model through a learning by a nonlinear predictive method and combining it with optimizing calculation.

**SOLUTION:** An optimization item input device 1 determines a range of a blending parameters of constituent components as a physical quantity and restriction conditions as a target function of a material design of a multicomponent material, an experimental data input device 2 inputs a blending parameter and a restriction condition, and an experimental data on its physical quantity, and a material model calculation device 3 calculates a material model relating a blending parameter, a restriction condition, and physical quantity of the multicomponent material by the nonlinear predictive method; and an optimizing calculation device 4 calculates a blending parameter of the constituent components of the multicomponent material matching a purpose by using the optimizing method based on a material model of the calculation result and inputted items and an optimization result output device 5 outputs an optimum blending parameter of the calculation result as a material optimized design plan.



## LEGAL STATUS

[Date of request for examination]

[Date of sending the examiner's decision of rejection]

[Kind of final disposal of application other than the examiner's decision of rejection or application converted registration]

[Date of final disposal for application]

[Patent number]

[Date of registration]

[Number of appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of requesting appeal against examiner's decision of rejection]

[Date of extinction of right]

Copyright (C); 1998,2003 Japan Patent Office

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開平10-55348

(43) 公開日 平成10年(1998) 2月24日

(51) Int.Cl. <sup>6</sup>	識別記号	庁内整理番号	F I	技術表示箇所
G 0 6 F 15/18	5 5 0		G 0 6 F 15/18	5 5 0 C
	5 6 0			5 6 0 Z
17/50			15/60	6 3 8
// G 0 6 F 17/00			15/20	Z

審査請求 未請求 請求項の数 2 F D (全 10 頁)

(21) 出願番号 特願平8-225863

(22) 出願日 平成8年(1996) 8月8日

(71) 出願人 000005278

株式会社ブリヂストン

東京都中央区京橋1丁目10番1号

(72) 発明者 中島 幸雄

東京都あきる野市小川678-18

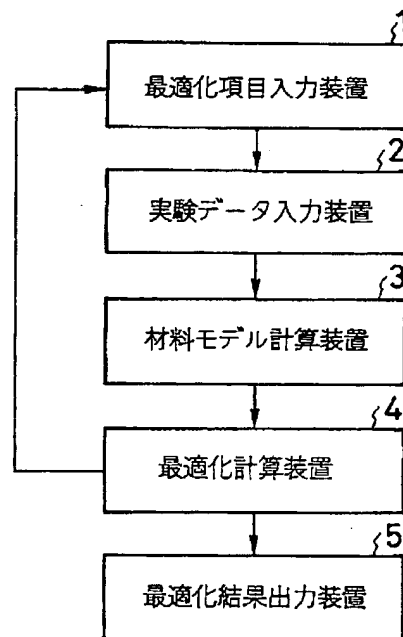
(74) 代理人 弁理士 河原 純一

(54) 【発明の名称】 多成分系材料最適化解析装置および方法

(57) 【要約】

【課題】 非線形化予測手法による学習で精度の良い材料モデルを作成し、最適化計算と組み合わせて有効な最適材料設計を可能とする。

【解決手段】 最適化項目入力装置1は多成分系材料の材料設計の目的関数となる物理量と制約条件としての構成成分の配合パラメータの範囲とを定め、実験データ入力装置2は配合パラメータおよび制約条件とその物理量の実験データを入力し、材料モデル計算装置3は非線形化予測手法によって多成分系材料の構成成分の配合パラメータおよび制約条件とその物理量とを関係づける材料モデルを計算し、最適化計算装置4は計算結果の材料モデルおよび入力された項目に基づいて最適化手法を用いて目的にあった多成分系材料の構成成分の配合パラメータを計算し、最適化結果出力装置5は計算結果の最適配合パラメータを材料最適化設計案として出力する。



**【特許請求の範囲】**

【請求項 1】 材料設計の目的関数となる物理量と、制約条件としての構成成分の配合パラメータの範囲とを定める最適化項目入力手段と、

非線形化予測手法によって多成分系材料の構成成分の配合パラメータおよび制約条件とその物理量とを関係づける材料モデルを計算する材料モデル計算手段と、

この材料モデル計算手段による計算結果の材料モデルおよび前記最適化項目入力手段により入力された項目に基づいて最適化手法を用いて目的にあった多成分系材料の構成成分の配合パラメータを計算する最適化計算手段とを具備することを特徴とする多成分系材料最適化解析装置。

【請求項 2】 材料設計の目的関数となる物理量と、制約条件としての構成成分の配合パラメータの範囲とを定める最適化項目入力ステップと、

非線形化予測手法によって多成分系材料の構成成分の配合パラメータおよび制約条件とその物理量とを関係づける材料モデルの計算ステップと、

この材料モデル計算ステップによる計算結果の材料モデルおよび前記最適化項目入力ステップにより入力された項目に基づいて最適化手法を用いて目的にあった多成分系材料の構成成分の配合パラメータを計算する最適化計算ステップとを含むことを特徴とする多成分系材料最適化解析方法。

**【発明の詳細な説明】****【0001】**

【発明の属する技術分野】本発明は多成分系材料最適化解析装置および方法に関し、特に多成分から構成される材料（以下、多成分系材料という）の設計、例えばタイヤ用ゴム配合設計等に利用できる多成分系材料最適化解析装置および方法に関する。

**【0002】**

【従来の技術】材料設計は、目的とする材料の物理量（物性値、特性値）を得るための構成成分の配合比率（配合パラメータ）および制約条件（コスト、製造条件等）を求めることである。従来は、経験的あるいは試行錯誤的に配合パラメータおよび制約条件を求める場合が多く、特に構成成分が3成分以上になると、その作業は非常に困難となっていた。

【0003】このような従来の材料設計の改良法として、階層型ニューラルネットワークを用いて材料特性を指定すると、多成分系材料の構成成分の配合パラメータが自動的に求められるようにした材料設計システムが提案されている（尾田十八・岡田裕康「ニューラルネットワークを用いた多成分系材料の材料設計法」、日本機械学会[N0. 940-25]第1回最適化シンポジウム講演論文集[’94-7-8, 9, 東京]p57-62参照）。

【0004】また、多成分系材料の構成成分の配合パラ

メータおよび制約条件とその物理量とを関係づける材料モデルの作成に多項式を仮定して最小2乗法でその係数を定める材料モデル計算と、最適化とを組み合わせた例がある（岩崎学、「混合実験の計画と解析」、p105～117, サイエンティスト社, 1994参照）。

**【0005】**

【発明が解決しようとする課題】上述した従来の階層型ニューラルネットワークを用いた材料設計システムでは、現実存在する材料から少し外れた材料特性をインプットすると、マイナスの配合パラメータがアウトプットされて活用が困難な場合もあるという問題点があった。

【0006】また、多項式を仮定する材料モデル計算を使用する場合には、多項式を仮定する際に任意性が入ること、3ヶ以上の構成成分から成る場合に多項式をどう仮定したならばよいかを決めることが難しいこと等の問題点があり、材料モデルの精度が高くなかった。そのため、この材料モデルに基づいて求めた材料設計案も有効なものとはならなかった。

【0007】本発明の目的は、非線形化予測手法による学習で精度の良い材料モデルを作成し、最適化計算手段と組み合わせて有効な最適材料設計を可能とする多成分系材料最適化解析装置を提供することにある。

【0008】また、本発明の他の目的は、非線形化予測手法による学習で精度の良い材料モデルを作成し、最適化計算ステップと組み合わせて有効な最適材料設計を可能とする多成分系材料最適化解析方法を提供することにある。

**【0009】**

【課題を解決するための手段】本発明の多成分系材料最適化解析装置は、材料設計の目的関数となる物理量と、制約条件としての構成成分の配合パラメータの範囲とを定める最適化項目入力手段と、非線形化予測手法によって多成分系材料の構成成分の配合パラメータおよび制約条件とその物理量とを関係づける材料モデルを計算する材料モデル計算手段と、この材料モデル計算手段による計算結果の材料モデルおよび前記最適化項目入力手段により入力された項目に基づいて最適化手法を用いて目的にあった多成分系材料の構成成分の配合パラメータを計算する最適化計算手段とを具備することを特徴とする。

【0010】また、本発明の多成分系材料最適化解析方法は、材料設計の目的関数となる物理量と、制約条件としての構成成分の配合パラメータの範囲とを定める最適化項目入力ステップと、非線形化予測手法によって多成分系材料の構成成分の配合パラメータおよび制約条件とその物理量とを関係づける材料モデルの計算ステップと、この材料モデル計算ステップによる計算結果の材料モデルおよび前記最適化項目入力ステップにより入力された項目に基づいて最適化手法を用いて目的にあった多成分系材料の構成成分の配合パラメータを計算する最適

化計算ステップとを含むことを特徴とする。

【0011】

【発明の実施の形態】次に、本発明について図面を参照して詳細に説明する。

【0012】図1は、本発明の一実施の形態に係る多成分系材料最適化解析装置の構成を示すブロック図である。本実施の形態に係る多成分系材料最適化解析装置は、最適化項目入力装置1と、実験データ入力装置2と、材料モデル計算装置3と、最適化計算装置4と、最適化結果出力装置5とから、その主要部が構成されている。

【0013】最適化項目入力装置1は、①最大化または最小化すべき物理量（これを目的関数OBJという）、②最大化または最小化するときに制約を設ける物理量、多成分系材料の構成成分の配合パラメータ $x_i$ （ $i=1\sim N$ ）および製造条件（以下、これらを制約条件Gという）、③多成分系材料の構成成分の配合パラメータ $x_i$ （ $i=1\sim N$ ）および制約条件Gのとりうる範囲、④最適化に関する手法の選択およびそのときのパラメータ等を入力する。例えば、多成分系材料がゴムである場合、物理量として、硬さ、引張強さ、伸び、圧縮永久ひずみ、引張強さ変化率、伸び変化率、硬さ変化、体積変化率、コスト等があり、構成成分として、天然ゴム、合成ゴム、カーボンブラック、加硫剤、加硫促進剤、老化防止剤、コスト等がある。

【0014】実験データ入力装置2は、多成分系材料の構成成分の配合パラメータ $x_i$ （ $i=1\sim N$ ）および制約条件Gとその物理量との実験データを入力する。

【0015】材料モデル計算装置3は、非線形化予測手法の1つであるニューラルネットワークによって多成分系材料の構成成分の配合パラメータ $x_i$ （ $i=1\sim N$ ）および制約条件Gとその物理量とを関係づける材料モデルを計算する。

【0016】図2は、材料モデル計算装置3の一例を示す模式図である。この材料モデル計算装置3は、入力層、中間層および出力層からなる3層のニューラルネットワークで構成され、入力 $I_j$ （ $i=1\sim N$ ）が配合パラメータ $x_i$ （ $i=1\sim N$ ）、出力 $O_k$ が物理量になるように設定されている。例えば、多成分系材料がゴムである場合、入力層として10個程度のPE（Processing Element）数、中間層として30個程度のPE数、出力層として10個程度のPE数とすることができる。なお、入力 $I_j$ と出力 $O_k$ との間には、数1のような関係がある。

【0017】

【数1】

$$\left. \begin{aligned} U_j &= \sum_{i=1}^n W_{ji} I_i + \theta_j \\ H_j &= f(U_j) \\ S_k &= \sum_{j=1}^m V_{kj} H_j + \gamma_k \\ O_k &= f(S_k) \end{aligned} \right\}$$

【0018】ただし、 $W_{ji}$ は入力層と中間層との間の結合係数、 $V_{kj}$ は中間層と出力層との間の結合係数、 $f(x) = \{1 + \tanh(x/u_0)\}$ （ $u_0$ は定数）、 $\theta_j$ は中間層のオフセット、 $\gamma_k$ は出力層のオフセット、 $N$ は入力層のPE数（配合パラメータの数と等しい）、 $m$ は中間層のPE数を示す。

【0019】最適化計算装置4は、最適化項目入力装置1で入力した目的関数OBJを最適化する配合パラメータ $x_i$ （ $i=1\sim N$ ）（以下、最適配合パラメータ $x_i$ （ $i=1\sim N$ ）と記述する）を計算する。ここでは、数理計画法、遺伝的アルゴリズム等の最適化手法を用いる。

【0020】最適化結果出力装置5は、最適化計算の結果として、最適化項目入力装置1で入力された項目を満足するように最適化された多成分系材料の構成成分の最適配合パラメータ $x_i^{OPT}$ （ $i=1\sim N$ ）および制約条件 $G^{OPT}$ を出力する。

【0021】図3を参照すると、本発明の一実施の形態に係る多成分系材料最適化解析方法の手順は、配合パラメータ、目的関数および最大実験回数設定ステップ101と、配合パラメータ範囲設定ステップ102と、カウンタ初期化ステップ103と、過去実験データ利用可能判定ステップ104と、実験計画ステップ105と、物理量実験ステップ106と、ニューラルネットワーク学習ステップ107と、最適化計算ステップ108と、実験回数カウンタ加算ステップ109と、最大実験回数到達判定ステップ110と、ループカウンタインクリメントステップ111と、配合パラメータ範囲再設定ステップ112と、最適配合パラメータ出力ステップ113と、同一配合有無判定ステップ114と、物理量実験およびデータベース登録ステップ115と、過去配合パラメータおよび物理量読み込みステップ116と、ニューラルネットワーク学習ステップ117と、全実験回数0設定ステップ118とを含んでいる。

【0022】図4を参照すると、材料モデル計算装置3の処理は、学習データおよびテストデータ読み込みステップ201と、結合係数およびオフセット初期化ステップ202と、学習データのニューラルネットワークへの入力ステップ203と、中間層および出力層誤差計算ステップ204と、結合係数およびオフセット更新ステップ205と、テストデータによる学習結果テストステップ206と、収束判定および繰り返し回数判定ステップ207とからなる。

【0023】図5を参照すると、最適化計算装置4の処理は、配合パラメータ初期値設定ステップ301と、目的関数および制約条件の初期値演算ステップ302と、配合パラメータカウンタ初期化ステップ303と、配合パラメータ変化ステップ304と、目的関数および制約条件演算ステップ305と、感度演算ステップ306と、配合パラメータカウンタインクリメントステップ307と、全配合パラメータ終了判定ステップ308と、配合パラメータ変化量予測ステップ309と、配合パラメータ更新および目的関数演算ステップ310と、目的関数収束判定ステップ311と、最適配合パラメータ決定ステップ312とを含んでいる。

【0024】次に、このように構成された本実施の形態に係る多成分系材料最適化解析装置の動作について、多成分系材料最適化解析方法とともに説明する。

【0025】まず、設計者は、最適化項目入力装置1を用いて、多成分系材料のどの構成成分の配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )を変化させて、どのような物理量を目的関数OBJとして、どの程度の実験回数(最大実験回数 $M_{max}$ )以内に最適配合パラメータ $x_i^{OPT}$  ( $i=1\sim N$ )を決定したいかを設定する(ステップ101)。最大実験回数 $M_{max}$ は、実験にかかる費用および最適配合を求めるのに要する期間等によって定められる定数である。

【0026】次に、設計者は、最適化項目入力装置1を用いて、ステップ101で設定した配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )のとりうる範囲 $x_i^L \leq x_i \leq x_i^U$  ( $i=1\sim N$ )を設定する(ステップ102)。なお、目的関数OBJに設定した物理量以外の物理量のとりうる範囲を必要に応じて任意に設定することもできる。

【0027】続いて、設計者は、実験回数カウンタ $M$ を0、ループカウンタ $h$ を1に初期化した後に(ステップ103)、ステップ101で設定した配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )および目的関数OBJに選ぶ物理量に関して過去の実験データを利用できるかどうかをデータベース(図示せず)を参照して判断する(ステップ104)。

【0028】過去の実験データを利用できない場合、設計者は、ステップ105に制御を移し、過去の実験データを利用できる場合はステップ116に制御を移す。

【0029】ステップ105では、設計者は、実験データ入力装置2を用いて、各配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )をどのように変化させて実験を行うかを実験計画する。このときに、直交表または最適実験計画を用いて実験に用いる構成成分の配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )を決定する(Box and Draper: "Empirical Model Building and Response Surfaces", p105~127およびp477~501, John Wiley

& Sons, 1987参照)。

【0030】次に、設計者は、実験データ入力装置2を用いて、ステップ106で決定した実験計画に沿って多成分系材料の各構成成分を配合し、得られた多成分系材料の物理量を測定する実験を行う(ステップ106)。このときの全実験回数を $n_h$ 回であるとする。例えば、直交表 $L_{27}$ の場合は、 $n_h=27$ 回の実験が必要になり、最適実験計画の場合は、 $n_h$ を任意に選ぶことができる。

【0031】続いて、設計者は、材料モデル計算装置3を用いて、入力層を多成分系材料の各構成成分の配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )、出力層を多成分系材料の物理量として、ニューラルネットワークでの学習を行う(ステップ107)。

【0032】詳しくは、材料モデル計算装置3は、多成分系材料の各構成成分の種類、各構成成分の配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )および物理量(実験値)からなる数値ないしは数千件の学習データおよびテストデータを読み込む(ステップ201)。また、材料モデル計算装置3は、ニューラルネットワークの結合係数 $W_{ji}$ ,  $V_{kj}$ およびオフセット $\theta_j$ ,  $\gamma_k$ を初期化する(ステップ202)。

【0033】次に、材料モデル計算装置3は、1件の学習データの配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )をニューラルネットワークに入力し(ステップ203)、当該学習データの物理量を参照してニューラルネットワークの中間層および出力層における誤差を計算し(ステップ204)、学習データの物理量に近い出力 $O_k$ が得られるように結合係数 $W_{ji}$ ,  $V_{kj}$ およびオフセット $\theta_j$ ,  $\gamma_k$ を更新する(ステップ205)。

【0034】続いて、材料モデル計算装置3は、テストデータの配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )をニューラルネットワークに入力して学習結果のテストを行う(ステップ206)。

【0035】次に、材料モデル計算装置3は、ニューラルネットワークの出力 $O_k$ にテストデータの物理量に近い物理量が得られるかどうかの収束判定を行うとともに繰り返し回数を判定し(ステップ207)、収束しておらずかつ繰り返し回数に到達していなければステップ203に制御を戻し、収束するかまたは繰り返し回数に達していれば処理を終了する。

【0036】ニューラルネットワークでの学習が終了すると、設計者は、最適化計算装置4を用いて、目的関数OBJを最適化する最適配合パラメータ $x_i^{OPT}$  ( $i=1\sim N$ )の計算を行う(ステップ108)。

【0037】詳しくは、最適化計算装置4は、配合パラメータ $x_i$  ( $i=1\sim N$ )の初期値を設定する(ステップ301)。

【0038】続いて、最適化計算装置4は、ステップ301で初期値として設定した配合パラメータ $x_i$  ( $i=$

1~N)を入力としてニューラルネットワークで計算された材料モデルによる想起を実行し、配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )に対応した物理量を予測し、その結果を用いて目的関数OBJの初期値および制約条件Gの初期値を演算する(ステップ302)。

【0039】次に、最適化計算装置4は、配合パラメータカウンタ $i$ を1に初期化した後(ステップ303)、ステップ301で設定された配合パラメータ $X_i$ を各々 $\Delta X_i$ ずつ変化させる(ステップ304)。

【0040】続いて、最適化計算装置4は、配合パラメータ $X_i$ を $\Delta X_i$ 変化させた後の目的関数OBJおよび制約条件Gをニューラルネットワークで計算された材料モデルによる想起を実行して演算する(ステップ305)。

【0041】次に、最適化計算装置4は、数2および数3に従って、配合パラメータ $X_i$ の単位変化量に対する目的関数OBJの変化量の割合である目的関数OBJの感度 $dOBJ/dX_i$ および配合パラメータ $X_i$ の単位変化量に対する制約条件Gの変化量の割合である制約条件Gの感度 $dG/dX_i$ をニューラルネットワークで計算された材料モデルによる想起を実行して各配合パラメータ $X_i$ 毎に演算する(ステップ306)。

【0042】

【数2】

$$X_i^{start} = X_i^L + \frac{X_i^U - X_i^L}{M_{max}} * j \quad (j=0 \sim M_{max})$$

【0043】

【数3】

$$\frac{dOBJ}{dX_i} = \frac{OBJ_j - OBJ_0}{\Delta X_i} = \frac{OBJ(X_i + \Delta X_i) - OBJ(X_i)}{(X_i + \Delta X_i) - (X_i)}$$

【0044】これらの感度 $dOBJ/dX_i$ および $dG/dX_i$ によって、配合パラメータ $X_i$ を $\Delta X_i$ 変化させたときに目的関数OBJがどの程度変化するかを予測することができる。

【0045】次に、最適化計算装置4は、配合パラメータカウンタ $i$ を1つインクリメントした後(ステップ307)、全ての配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )について演算が終了したか否かを判断し(ステップ308)、全ての配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )について演算が終了していない場合には、ステップ304からステップ308を繰り返し実行する。

【0046】全ての配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )について演算が終了すると、最適化計算装置4は、ニューラルネットワークで計算された材料モデルによる想起を実行して求めた感度 $dOBJ/dX_i$  ( $i=1\sim N$ )および感度 $dG/dX_i$  ( $i=1\sim N$ )を用いて、数理論法等の最適化手法により制約条件Gを満たしながら目的関数OBJを最小にする配合パラメータ $X_i$  ( $i=$

1~N)の変化量を予測する(ステップ309)。

【0047】次に、最適化計算装置4は、予測された配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )の変化量を用いて、各配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )を更新するとともに、更新した配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )を入力としてニューラルネットワークで計算された材料モデルによる想起を実行して目的関数OBJを演算する(ステップ310)。

【0048】続いて、最適化計算装置4は、ステップ310で演算した目的関数OBJとステップ302で演算した目的関数OBJとの差と、あらかじめインプットされたしきい値とを比較することで目的関数OBJが収束したか否かを判定し(ステップ311)、目的関数OBJが収束していない場合にはステップ309で予測された変化量を加味した配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )をあらたな初期値として、ステップ303からステップ311を繰り返し実行する。

【0049】ステップ311で目的関数OBJが収束したと判断されたときには、最適化計算装置4は、ステップ302で初期値として設定した配合パラメータ $X_i$ から出発して制約条件Gを満たしながら目的関数OBJを最適化する最適配合パラメータ $X_i^{OPT}$  ( $i=1\sim N$ )を決定する(ステップ312)。なお、最適配合パラメータ $X_i^{OPT}$  ( $i=1\sim N$ )は、次の2点を考慮して求める。①目的関数OBJが小さい値を有する(目的関数OBJに選んだ物理量が小さい方が良くように設定、大きい方が良く場合にはマイナスの符号を付けて対応する)。②求められた配合の囲りで配合パラメータ $X_i$ を少し動かしても目的関数OBJおよび制約条件Gが余り変化しない。

【0050】最適化計算装置4による最適化計算が終了すると、設計者は、実験回数カウンタMにステップ106で行った全実験回数 $n_h$ を加えた後(ステップ109)、実験回数カウンタMがステップ101で設定した最大実験回数 $M_{max}$ より小さいかどうかを判定する(ステップ110)。実験回数カウンタMが最大実験回数 $M_{max}$ より小さい場合には、設計者は、ループカウンタ $h$ を1つインクリメントした後(ステップ111)、最適化項目入力装置1を用いて、配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )のとりうる範囲 $X_i^L \leq X_i \leq X_i^U$  ( $i=1\sim N$ )を再設定し(ステップ112)、ステップ105に制御を戻す。もっと実験点を増やすことが可能な場合には、設計者は、ステップ108で求められた最適配合パラメータ $X_i^{OPT}$  ( $i=1\sim N$ )の周囲で配合パラメータ $X_i$  ( $i=1\sim N$ )のとりうる範囲 $X_i^L \leq X_i \leq X_i^U$ を狭めた領域で再実験の実験計画を行い(ステップ106)、最終的に、決定される最適配合パラメータ $X_i^{OPT}$  ( $i=1\sim N$ )の精度を向上させることができる。

【0051】一方、ステップ110で実験回数カウンタ

Mが最大実験回数 $M_{\max}$  以上の場合、設計者は、最適化結果出力装置5を用いて、最後に得られた最適配合パラメータ $x_j$  OPT ( $i=1\sim N$ ) を出力する(ステップ113)。

【0052】次に、設計者は、最適化結果出力装置5を用いて、データベースを参照して過去の実験データ内に同様な配合パラメータ $x_j$  ( $i=1\sim N$ ) があるかどうかを判断し(ステップ114)、あった場合には、ただちに処理を終了し、ない場合には、最適配合パラメータ $x_j$  OPT ( $i=1\sim N$ ) となるように各構成成分を配合し、得られた多成分系材料の物理量を測定する実験を行い、実験データをデータベースに登録する(ステップ115)。

【0053】他方、ステップ104で過去の実験データを利用できる場合には、設計者は、実験データ入力装置2を用いて、ステップ101で設定した配合パラメータ $x_j$  ( $i=1\sim N$ ) および目的関数OBJに関連した過去の配合パラメータ $x_j$  ( $i=1\sim N$ ) および物理量の実験データを読み込む(ステップ116)。

【0054】次に、設計者は、ステップ107と同様に、材料モデル計算装置3を用いて、入力層を多成分系材料の各構成成分の配合パラメータ $x_j$  ( $i=1\sim N$ )、出力層を多成分系材料の物理量としてニューラルネットワークでの学習を行う(ステップ117)。

【0055】ニューラルネットワークでの学習が終了すると、設計者は、全実験回数 $n_h$  を0とした後(ステップ118)、ステップ108に制御を移す。

【0056】以下、ステップ104で過去の実験データを利用できない場合と同様に処理が行われる。

【0057】なお、上記実施の形態では、非線形化予測手法としてニューラルネットワークを用いて材料モデルを作成したが、ファジィ等の他の非線形化予測手法を用いるようにすることもできる。

【0058】また、上記実施の形態では、多成分系材料の最適配合を直接的に生成するようにしたが、多成分系材料の構成成分の粒径、粒径比等のさらに抽象的な情報得られるようにすることもできる。

【0059】

【発明の効果】以上説明したように、本発明の多成分系材料最適化解析装置によれば、関数型を仮定することなしに、3ヶ以上の構成成分の配合パラメータおよび制約条件と多成分系材料の物理量とに関する実験データを学習しながら相互の関係を見出すことができる非線形化予測手法による材料モデル計算手段と、材料モデル計算手段で計算された材料モデルに基づいて最適化手法を用いて目的にあった多成分系材料の構成成分の配合パラメータを計算する最適化計算手段とを組み合わせる材料最適設計案を出力するようにしたので、3ヶ以上の構成成分の配合パラメータおよび制約条件と多成分系材料の物理量との関係を容易に見出すことができるとともに、材料

モデルの精度が良く、有効性のある材料最適化設計案が出力できるという効果がある。

【0060】また、本発明の多成分系材料最適化解析装置によれば、関数型を仮定することなしに、3ヶ以上の構成成分の配合パラメータおよび制約条件と多成分系材料の物理量とに関する実験データを学習しながら相互の関係を見出すことができる非線形化予測手法による材料モデル計算ステップと、材料モデル計算ステップで計算された材料モデルに基づいて最適化手法を用いて目的にあった多成分系材料の構成成分の配合パラメータを計算する最適化計算ステップとを組み合わせる材料最適設計案を出力するようにしたので、3ヶ以上の構成成分の配合パラメータおよび制約条件と多成分系材料の物理量との関係を容易に見出すことができるとともに、材料モデルの精度が良く、有効性のある材料最適化設計案が出力できるという効果がある。

【図面の簡単な説明】

【図1】本発明の一実施の形態に係る多成分系材料最適化解析装置の構成を示すブロック図である。

【図2】図1中の材料モデル計算装置の構成を説明する模式図である。

【図3】本発明の一実施の形態に係る多成分系材料最適化解析方法の手順を示すフローチャートである。

【図4】図1中の材料モデル計算装置における処理を示すフローチャートである。

【図5】図1中の最適化計算装置における処理を示すフローチャートである。

【符号の説明】

- 1 最適化項目入力装置
- 2 実験データ入力装置
- 3 材料モデル計算装置
- 4 最適化計算装置
- 5 最適化結果出力装置
- 101 配合パラメータ、目的関数および最大実験回数設定ステップ
- 102 配合パラメータ範囲設定ステップ
- 103 カウンタ初期化ステップ
- 104 過去実験データ利用可能判定ステップ
- 105 実験計画ステップ
- 106 物理量実験ステップ
- 107 ニューラルネットワーク学習ステップ
- 108 最適化計算ステップ
- 109 実験回数カウンタ加算ステップ
- 110 最大実験回数到達判定ステップ
- 111 ループカウンタインクリメントステップ
- 112 配合パラメータ範囲再設定ステップ
- 113 最適配合パラメータ出力ステップ
- 114 同一配合有無判定ステップ
- 115 物理量実験およびデータベース登録ステップ
- 116 過去配合パラメータおよび物理量読み込みステッ



ブ

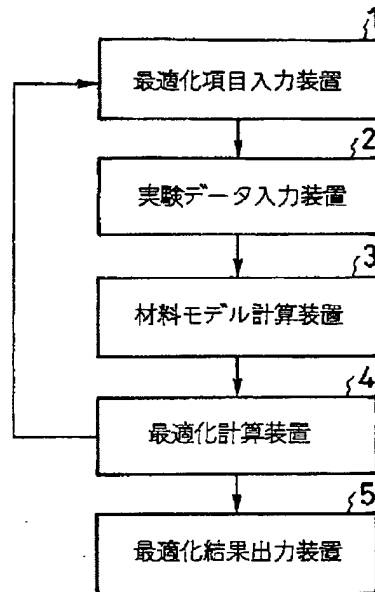
117 ニューラルネットワーク学習ステップ

118 全実験回数 0 設定ステップ

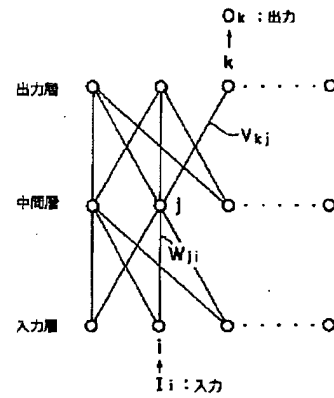
【数 4】

$$\frac{dG}{dX_i} = \frac{G_i - G_o}{\Delta X_i}$$

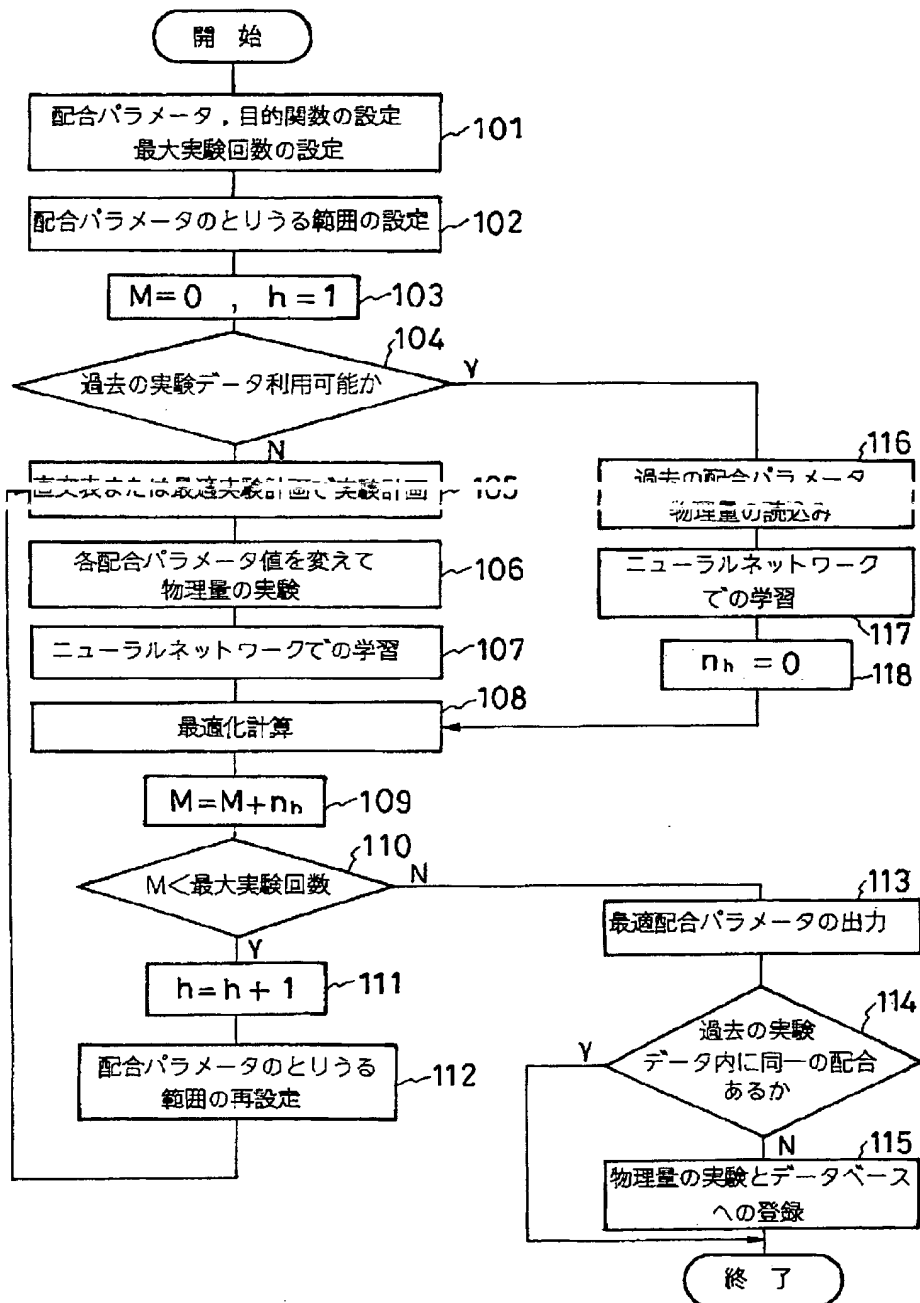
【図 1】



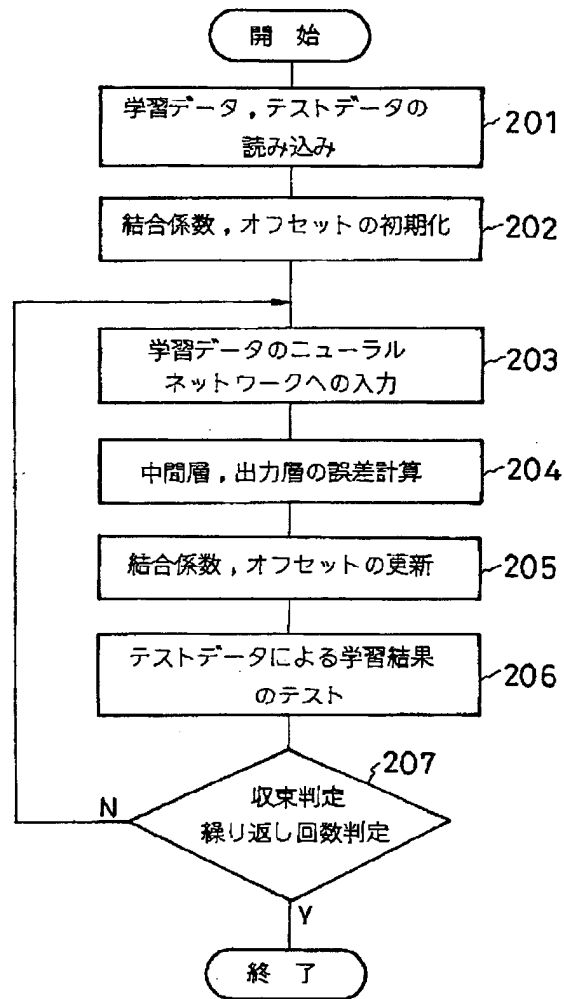
【図 2】



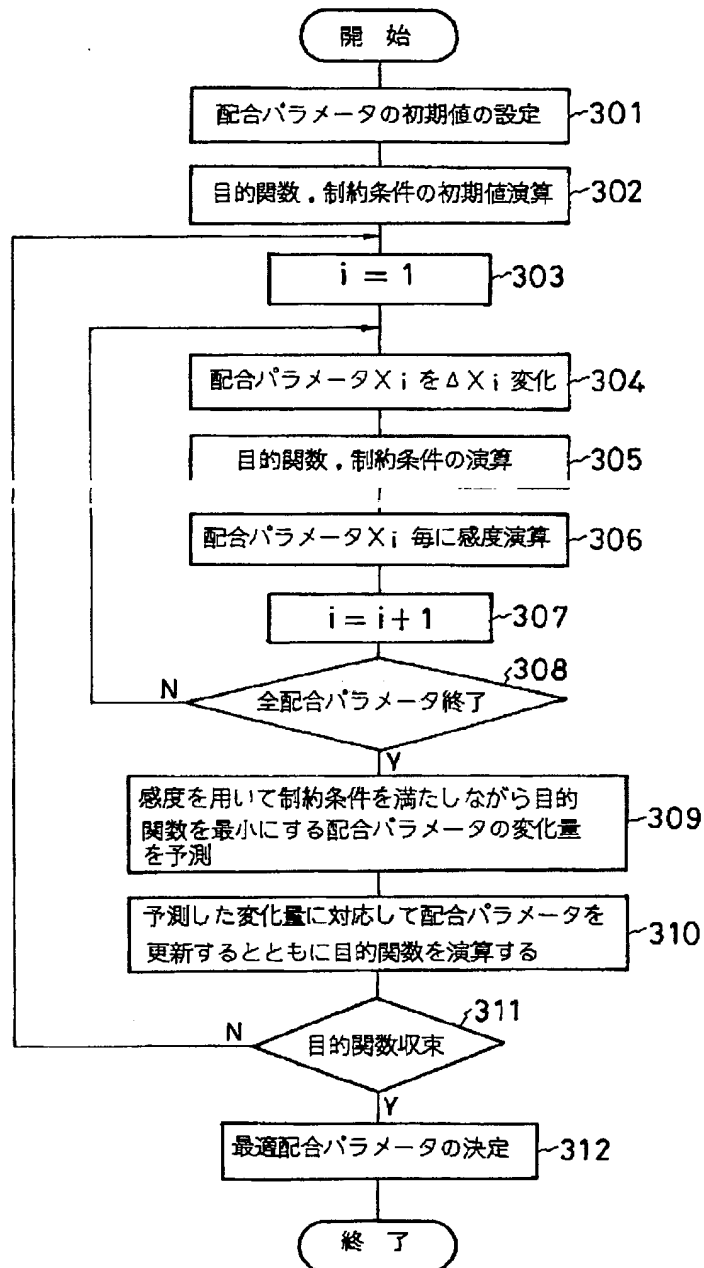
【図3】



【図 4】



【図5】



**(19) JAPANESE PATENT OFFICE (JP)****(11) Japanese Laid-Open Patent Application (Kokai) No. H10-55348****(12) Official Gazette for Laid-Open Patent Applications (A)**

(43) Disclosure Date: February 24, 1998

---

(51) Int. Cl. <sup>6</sup>	Class. Symbols	JPO File Nos.	FI	Tech. Indic.
G 06 F 15/18	550		G06F 15/18	550C
	560			560Z
17/50			15/60	638
// G 06 F 17/00			15/20	Z

Request for Examination: Not yet submitted

Number of Claims: 2      FD      (Total of 10 pages [in original])

---

(21) Application No.: H8-225863

(22) Filing Date: August 8, 1996

(71) Applicant: 000005278

Bridgestone Corporation

1-10-1 Kyobashi, Chuo-ku, Tokyo

(72) Inventor: Yukio Nakajima

678-18 Ogawa, Akiruno-shi, Tokyo

(74) Agent: Jyun'ichi Kawahara, Patent Attorney

(54) [Title of the Invention] Apparatus and Method for the Optimization Analysis of Multi-Component Materials

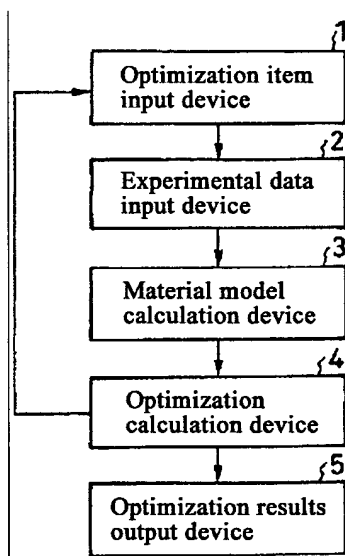
(57) [Abstract]

[Problem]

To create models of materials with good precision by means of learning based on nonlinear predictive techniques, and thus permit the design of effective optimal materials in combination with optimization calculations.

[Means of Solving]

An optimization item input device 1 determines a physical quantity serving as the object function for the material design of a multi-component material and a composition parameter range for the constituent components serving as constraint conditions. An experimental data input device 2 accepts input of composition parameters, constraint conditions and the physical quantities thereof. A material model calculation device 3 uses nonlinear predictive techniques to calculate a material model that associates the composition parameters and constraint conditions of the constituent components of the multi-component material and the physical quantities thereof. An optimization calculation device 4 uses the material model from the results of calculation and optimization techniques based on the input items to calculate composition parameters for the constituent components of the multi-component material that are suited to the object. An optimization results output device 5 provides output of the results of calculation in the form of a proposed material optimization design for the optimal composition parameters.



**[Claims]**

1. A multi-component material optimization analysis apparatus characterized in comprising:

an optimization item input means that determines a physical quantity serving as the object function for the material design and a composition parameter range for the constituent components serving as constraint conditions,

a material model calculation means that uses nonlinear predictive techniques to calculate a material model that associates the composition parameters and constraint conditions of the constituent components of the multi-component material and the physical quantities thereof, and

an optimization calculation means that uses the material model from the results of calculation by this material model calculation means and optimization techniques based on the items input by said optimization item input means to calculate composition parameters for the constituent components of the multi-component material that are suited to the object.

2. A multi-component material optimization analysis method characterized in comprising the steps of:

an optimization item input step of determining a physical quantity serving as the object function for the material design and a composition parameter range for the constituent components serving as constraint conditions,

a material model calculation step of using nonlinear predictive techniques to calculate a material model that associates the composition parameters and constraint conditions of the constituent components of the multi-component material and the physical quantities thereof, and

an optimization calculation step of using the material model from the results of calculation in this material model calculation step and optimization techniques based on the items input in said optimization item input step to calculate composition parameters for the constituent components of the multi-component material that are suited to the object.

**[Detailed Description of the Invention]**

[0001]

**[Technical Field of the Invention]**

The present invention is related to an apparatus and method for the optimization analysis of multi-component materials, and particularly to an apparatus and method for the optimization analysis of multi-component materials that can be utilized in the design of materials consisting of multiple components (hereinafter referred to as the multi-component materials), e.g. the design of the composition of rubber for use in tires.

[0002]

**[Prior Art]**

Material design is the process of finding the composition ratios (composition parameters) of constituent components and constraint conditions (cost, manufacturing conditions, etc.) in order to obtain the physical quantity for the material (physical property values, characteristic values) that is the object. In the past, the composition parameters and constraint conditions have often been found by experience and trial-and-error, and this work

becomes extremely difficult particularly when the number of constituent components is three or greater.

[0003]

In an improved method of this conventional material design, when the material characteristics are specified using a hierarchical neural network, a material design system has been proposed such that the composition parameters of constituent components of a multi-component material are found automatically (Mitsuya Oda, Hiroyasu Okada: "Material Design Method for Multi-Component Materials using a Neural Network" [*Nyūraru Nettowāku wo Mochiita Taseibunkei Zairyō no Zairyō Sekkei Hō*], Japan Society of Mechanical Engineers [No. 940-25], Proceedings of the First Optimization Symposium [July 8-9, 1994, Tokyo], pp. 57-62).

[0004]

In addition, there was an example wherein polynomials are assumed to create a material model that associates the composition parameters of the constituent components of a multi-component material and the constraint conditions to the physical quantities, and then the material model calculations that determine the coefficients thereof by the least-squares method are combined with optimization (Manabu Iwasaki, Planning and Analysis of Mixing Experiments [*Kongō Jikken no Keikaku to Kaiseki*], pp. 105-117, Scientist Inc., 1994).

[0005]

#### **[Problem that the Invention is Intended to Solve]**

The conventional material design system for multi-component materials using a neural network described above has problems in that if materials characteristics that are slightly different from those of materials that actually exist are input, then negative composition parameters may be output, thus making it difficult to implement in practice.

[0006]

In addition, when using a material model calculation that assumes polynomials, a certain amount of arbitrariness enters when assuming polynomials, and it is difficult to determine how the polynomials are to be assumed when the material consists of three or more constituent elements, among other problems, so the material was not modeled to high precision. For this reason, the proposed material design found based on that material model also does not become a valid one.

[0007]

An object of the present invention is to provide an apparatus for the optimization analysis of multi-component materials that creates models of materials with good precision by means of learning based on nonlinear predictive techniques, and thus permit the design of effective optimal materials in combination with optimization calculations.

[0008]

Another object of the present invention is to provide a method for the optimization analysis of multi-component materials by creating models of materials with good precision by means of learning based on nonlinear predictive techniques, and thus permitting the design of effective optimal materials in combination with optimization calculations.

[0009]

#### **[Means of Solving the Problems]**



The multi-component material optimization analysis apparatus according to the present invention is characterized in comprising: an optimization item input means that determines a physical quantity serving as the object function for the material design and a composition parameter range for the constituent components serving as constraint conditions, a material model calculation means that uses nonlinear predictive techniques to calculate a material model that associates the composition parameters and constraint conditions of the constituent components of the multi-component material and the physical quantities thereof, and an optimization calculation means that uses the material model from the results of calculation by this material model calculation means and optimization techniques based on the items input by said optimization item input means to calculate composition parameters for the constituent components of the multi-component material that are suited to the object.

[0010]

The multi-component material optimization analysis method according to the present invention is characterized in comprising the steps of: an optimization item input step of determining a physical quantity serving as the object function for the material design and a composition parameter range for the constituent components serving as constraint conditions, a material model calculation step of using nonlinear predictive techniques to calculate a material model that associates the composition parameters and constraint conditions of the constituent components of the multi-component material and the physical quantities thereof, and an optimization calculation step of using the material model from the results of calculation in this material model calculation step and optimization techniques based on the items input in said optimization item input step to calculate composition parameters for the constituent components of the multi-component material that are suited to the object.

[0011]

Here follows a detailed description of the present invention made with reference to the drawings.

[0012]

FIG. 1 is a block diagram that shows the constitution of one embodiment of the multi-component material optimization analysis apparatus according to the present invention. The multi-component material optimization analysis apparatus according to this embodiment consists of: an optimization item input device 1, experimental data input device 2, material model calculation device 3, optimization calculation device 4 and an optimization results output device 5 as its principal components.

[0013]

The optimization item input device 1 accepts input of: (1) a physical quantity to be maximized or minimized (this is referred to as the object function *OBJ*), (2) a physical quantity that provides constraint at the time of maximizing or minimizing, composition parameters  $X_i$  (where  $i = 1$  to  $N$ ) for the constituent components of the multi-component material and manufacturing conditions (hereinafter these are referred to as the constraint condition *G*), (3) ranges of values that the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) and the constraint condition *G* may take, and (4) the selection of the technique with regard to optimization and the parameters at that time, etc. If the multi-component material is rubber, for example, then the physical quantity may be the hardness, tensile strength, elongation, compression permanent set, rate of change of tensile strength, rate of change of elongation, [rate of] change of hardness, rate of change of volume, cost and the like, the constituent components may be natural rubber, synthetic rubber, carbon black, a vulcanizing agent, vulcanization accelerator, antioxidant, cost [sic] and the like, for example.

[0014]

As experimental data, the experimental data input device 2 accepts input of the composition parameters  $X_i$  ( $i=1$  to  $N$ ) for the constituent components of the multi-component material and the constraint condition  $G$  and physical quantities thereof.

[0015]

The material model calculation device 3 calculates a material model that associates the composition parameters  $X_i$  ( $i=1$  to  $N$ ) for the constituent components of the multi-component material and the constraint condition  $G$  and physical quantities thereof by means of a neural network which is one nonlinear prediction technique.

[0016]

FIG. 2 is a schematic diagram of one example of a material model calculation device 3. This material model calculation device 3 is structured as a three-layer network consisting of an input layer, intermediate layer and output layer, set so that the inputs  $I_i$  ( $i=1$  to  $N$ ) become the composition parameters  $X_i$  ( $i=1$  to  $N$ ) and the outputs  $O_k$  become the physical quantities. For example, in the case that the multi-component material is rubber, the input layer may consist of roughly 10 PEs (Processing Elements), the intermediate layer may consist of roughly 30 PEs and the output layer may consist of roughly 10 PEs. Note that the relationships illustrated in Equation (1) hold true between the inputs  $I_i$  and the outputs  $O_k$ .

[0017]

$$\left. \begin{aligned} U_j &= \sum_{i=1}^n W_{ji} I_i + \theta_j \\ H_j &= f(U_j) \\ S_k &= \sum_{j=1}^m V_{kj} H_j + \gamma_k \\ O_k &= f(S_k) \end{aligned} \right\} \dots \dots \dots (1)$$

[0018]

Here,  $W_{ji}$  is the coupling coefficient between the input layer and intermediate layer,  $V_{kj}$  is the coupling coefficient between the intermediate layer and output layer,  $f(x) = \{1 + \tanh(x/\mu_0)\}$  (where  $\mu_0$  is a constant),  $\theta_j$  is an offset in the intermediate layer,  $\gamma_k$  is an offset in the output layer,  $N$  is the number of PEs in the input layer (equal to the number of composition parameters) and  $m$  is the number of PEs in the intermediate layer.

[0019]

The optimization calculation device 4 calculates the composition parameters  $X_i$  ( $i=1$  to  $N$ ) (hereinafter referred to as the optimal composition parameters  $X_i$  ( $i=1$  to  $N$ )) that optimize the object function  $OBJ$  input by the optimization item input device 1. Here, mathematical programming, genetic algorithms or other optimization techniques are used.

[0020]

As a result of the optimization calculation, the optimization results output device 5 provides output of the optimal composition parameters  $X_i^{OPT}$  ( $i=1$  to  $N$ ) and constraint conditions  $G^{OPT}$  so as to satisfy the items input by the optimization item input device 1.

[0021]

In reference to FIG. 3, the procedure of the method for the optimization analysis of multi-component materials according to an embodiment of the present invention comprises the following steps: a step of setting the composition parameters, object function and maximum number of experiment runs 101, a step of setting the composition parameter range 102, a step of initializing counters 103, a step of determining the usability of past experimental data 104, an experiment planning step 105, a physical quantity experiment step 106, a neural network learning step 107, an optimization calculation step 108, an experiment run counter incrementing step 109, a step of determining whether or not the maximum number of experiment runs has been reached 110, a loop counter incrementing step 111, a step of resetting the composition parameter range 112, an optimal composition parameter output step 113, a step of determining the presence of the same composition 114, a physical quantity experiment and database registration step 115, a step of reading past composition parameters and physical quantities 116, a neural network learning step 117 and a step of setting the total number of experiment runs to 0 118.

[0022]

In reference to FIG. 4, the processing performed by the material model calculation device 3 includes: a step of reading learning data and test data 201, a coupling coefficient and offset initialization step 202, a step of providing input of learning data to the neural network 203, a step of calculating the error between the intermediate layer and output layer 204, a coupling coefficient and offset update step 205, a step of testing the results of learning with test data 206 and a step of determining convergence and determining the number of iterations 207.

[0023]

In reference to FIG. 5, the processing performed by the optimization calculation device 4 includes: a step of setting initial values for the composition parameters 301, a step of calculating the initial values of the object function and constraint conditions 302, a step of initializing the composition parameter counter 303, a step of varying the composition parameters 304, a step of calculating the object function and constraint conditions 305, a sensitivity calculation step 306, a step of incrementing the composition parameter counter 307, a step of determining the end of all composition parameters 308, a step of predicting the amount of change in the composition parameters 309, a step of updating the composition parameters and calculating the object function 310, a step of determining convergence of the object function 311 and a step of determining the optimal composition parameters 312.

[0024]

Here follows a description of the operation of an apparatus for the optimization analysis of multi-component materials according to the embodiment of the present invention thus constituted.

[0025]

First, the designer uses the optimization item input device 1 to set which of the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) for the constituent components of the multi-component material are to be changed, which physical property is to be set as the object function  $OBJ$ , and how many experiment runs are to be used (the maximum number of experiment runs  $M_{max}$ ) in order to determine the optimal composition parameters  $X_i^{OPT}$  ( $i = 1$  to  $N$ ) (Step 101). The maximum number of experiment runs  $M_{max}$  is a constant determined in light of the costs of experiments, time required to find the optimal composition and other factors.

[0026]

Next, the designer uses the optimization item input device 1 to set the range of values  $X_i^L \leq X_i \leq X_i^U$  ( $i = 1$  to  $N$ ) that the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) set in Step 101 may assume (Step 102). Note that if necessary, the range of values that physical quantities other than the physical quantity set as the object function  $OBJ$  may assume may also be set arbitrarily.

[0027]

Then, the designer initializes the experiment run counter  $M$  to 0 and initializes the loop counter  $h$  to 1 (Step 103) and then refers to databases (not shown) to determine whether or not past experimental data can be utilized for the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) and object function  $OBJ$  set in Step 101 (Step 104).

[0028]

In the case that past experimental data cannot be utilized, the designer moves control to Step 105, but if past experimental data can be utilized, control moves to Step 116.

[0029]

In Step 105, the designer uses the experimental data input device 2 to design an experiment plan, namely how the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) are to be varied while conducting the experiments. At this time, an orthogonal array or optimal experiment plan is used to determine the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) for the constituent components used in the experiment (see Box and Draper: Empirical Model Building and Response Surfaces, pp. 105-127 and pp. 477-501, John Wiley & Sons, 1987).

[0030]

Next, the designer uses the experimental data input device 2 to blend the various constituent components of the multi-component material in accordance with the experiment plan determined in Step 106, and then perform experiments to measure the physical quantities of the multi-component material thus obtained (Step 106). At this time, the total number of experiment runs is set to be  $n_h$ . For example, in the case of an  $L_{27}$  orthogonal array, then the number of experiment runs must be  $n_h = 27$ , but in the case of an optimal experiment plan, then  $n_h$  may be selected arbitrarily.

[0031]

Then, the designer uses the material model calculation device 3 to allow the neural network to learn the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) for the constituent components of the multi-component material as the input layer, and the physical quantities of the multi-component material as the output layer (Step 107).

[0032]

In more detail, the material model calculation device 3 reads in several hundred or several thousand records of learning data and test data consisting of the types of constituent components in the multi-component material, composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) for each constituent component and the physical quantities (experimental values) (Step 201). In addition, the material model calculation device 3 initializes the coupling coefficients  $W_{ji}$  and  $V_{kj}$  and the offsets  $\theta_j$  and  $\gamma_k$  of the neural network (Step 202).

[0033]

Next, the material model calculation device 3 provides input of the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) of one record of learning data to the neural network (Step 203), calculates the errors in the intermediate layer and output layer of the neural network in

reference to the physical quantities in this learning data (Step 204), and updates the coupling coefficients  $W_{ji}$  and  $V_{kj}$  and the offsets  $\theta_j$  and  $\gamma_k$  of the neural network so that outputs  $O_k$  closer to the physical quantities in the learning data are obtained (Step 205).

[0034]

Then, the material model calculation device 3 provides input of the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) from test data to the neural network and conducts a test of the results of learning (Step 206).

[0035]

Next, the material model calculation device 3 performs a convergence determination as to whether or not the outputs  $O_k$  of the neural network give physical quantities closer to the physical quantities of the test data and also performs a determination on the number of iterations (Step 207). If convergence has not been reached and the number of iterations has not been reached, then control returns to Step 203; if convergence has been reached or the number of iterations has been reached, then processing ends.

[0036]

When the neural network has finished learning, the designer uses the optimization calculation device 4 to perform a calculation of the optimal composition parameters  $X_i^{OPT}$  ( $i = 1$  to  $N$ ) which optimize the object function  $OBJ$  (Step 108).

[0037]

In more detail, the optimization calculation device 4 sets the initial values of the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) (Step 301).

[0038]

Then, the optimization calculation device 4 takes the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) set as initial values in Step 301 as input and executes a recollection by means of the material model calculated by the neural network, predicts the physical quantities corresponding to the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) and uses these results to calculate the initial values of the object function  $OBJ$  and the constraint condition  $G$  (Step 302).

[0039]

Next, the optimization calculation device 4 initializes the composition parameter counter  $i$  to 1 (Step 303) and varies each of the composition parameters  $X_i$  set in Step 301 by the increment  $\Delta X_i$  (Step 304).

[0040]

Then, the optimization calculation device 4 executes a recollection based on the material model calculated by the neural network to calculate the object function  $OBJ$  and constraint condition  $G$  after varying the composition parameters  $X_i$  by  $\Delta X_i$  (Step 305).

[0041]

Next, the optimization calculation device 4 executes a recollection based on the material model calculated by the neural network to calculate, for each of the composition parameters  $X_i$ , the sensitivity  $dOBJ/dX_i$  of the object function  $OBJ$ , which is the ratio of the change in the object function  $OBJ$  to the unit change in the composition parameter  $X_i$  and the sensitivity  $dG/dX_i$  of the constraint condition  $G$ , which is the ratio of the change in the constraint condition  $G$  to the unit change in the composition parameter  $X_i$  based on Equation (2) and Equation (3) below (Step 306).

[0042]

$$X_i^{start} = X_i^L + \frac{X_i^U - X_i^L}{M_{unit}} * j \quad (j = 0 \text{ to } M_{unit}) \dots\dots\dots (2)$$

[0043]

$$\frac{dOBJ}{dX_i} = \frac{OBJ_i - OBJ_o}{\Delta X_i} = \frac{OBJ(X_i + \Delta X_i) - OBJ(X_i)}{(X_i + \Delta X_i) - (X_i)} \dots\dots\dots (3)$$

[0044]

These sensitivities  $dOBJ/dX_i$  and  $dG/dX_i$  can be used to predict the degree of change in the object function  $OBJ$  when the composition parameter  $X_i$  is varied by  $\Delta X_i$ .

[0045]

Next, the optimization calculation device 4 increments the composition parameter counter  $i$  by 1 (Step 307) and then makes a determination of whether or not the calculation of all of the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) is complete (Step 308), and if the calculation of all of the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) is not complete, then Steps 304 through 308 are repeated.

[0046]

When the calculation of all composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) is complete, the optimization calculation device 4 uses the sensitivity  $dOBJ/dX_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) and sensitivity  $dG/dX_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) found by executing the recollection based on the material model calculated by the neural network to predict, by mathematical programming or another optimization technique, the changes in the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) that minimize the object function  $OBJ$  while satisfying the constraint condition  $G$  (Step 309).

[0047]

Next, the optimization calculation device 4 uses the predicted changes in the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) to update the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) and also use the updated composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) as input to execute a recollection by means of the material model calculated by the neural network and thus calculate the object function  $OBJ$  (Step 310).

[0048]

Then, the optimization calculation device 4 compares the difference between the object function  $OBJ$  calculated in Step 310 and the object function  $OBJ$  calculated in Step 302 against a threshold value input in advance, and thus determines whether or not the object function  $OBJ$  has converged (Step 311). If the object function  $OBJ$  has not converged, Steps 303 through 311 are repeated taking the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) modified by the changes predicted in Step 309 as the new initial values.

[0049]

If the object function  $OBJ$  is determined to have converged in Step 311, the optimization calculation device 4 starts from the composition parameters  $X_i$  set as initial values in Step 302 to determine the optimal composition parameters  $X_i^{OPT}$  ( $i = 1$  to  $N$ ) that optimize the object function  $OBJ$  while satisfying the constraint condition  $G$  (Step 312). Note that the optimal composition parameters  $X_i^{OPT}$  ( $i = 1$  to  $N$ ) are to be found in consideration of the following two points: (1) the object function  $OBJ$  is to have a small value (they are to be

set so that it is best for the physical quantity selected for the object function  $OBJ$  to be small; if it is best to be large, then handle this by adding a minus sign), and (2) the object function  $OBJ$  and constraint condition  $G$  are not to change much even if the composition parameters  $X_i$  are moved slightly within the range of compositions thus found.

[0050]

Once the optimization calculations performed by the optimization calculation device 4 are complete, the designer adds the total number of experiment runs  $n_h$  performed in Step 106 to the experiment run counter  $M$  (Step 109) and then determines whether or not the value of the experiment run counter  $M$  is smaller than the maximum number of experiment runs  $M_{max}$  set in Step 101 (Step 110). If the value of the experiment run counter  $M$  is smaller than the maximum number of experiment runs  $M_{max}$ , then the designer increments the loop counter  $h$  by 1 (Step 111) and uses the optimization item input device 1 to reset the range of values  $X_i^L \leq X_i \leq X_i^U$  ( $i = 1$  to  $N$ ) that the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) may assume (Step 112), and returns control to Step 105. If it is possible to increase the number of points of experimental data, then the designer may redo the experimental plan for a retest in a domain with a narrowed range of values  $X_i^L \leq X_i \leq X_i^U$  that the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) may assume within the range of optimal composition parameters  $X_i^{OPT}$  ( $i = 1$  to  $N$ ) found in Step 108 (Step 106), ultimately improving the precision of the optimal composition parameters  $X_i^{OPT}$  ( $i = 1$  to  $N$ ) thus determined.

[0051]

On the other hand, if the value of the experiment run counter  $M$  is greater than the maximum number of experiment runs  $M_{max}$ , then the designer uses the optimization results output device 5 to provide output of the optimal composition parameters  $X_i^{OPT}$  ( $i = 1$  to  $N$ ) last obtained (Step 113).

[0052]

Next, the designer uses the optimization results output device 5 to consult a database and determine whether or not the past experimental data contains the same composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) (Step 114), and if so ends processing immediately, but if not, blends the various constituent components so as to match the optimal composition parameters  $X_i^{OPT}$  ( $i = 1$  to  $N$ ), and then performs experiments to measure the physical quantities of the multi-component material thus obtained and registers the experimental data in the database (Step 115).

[0053]

On the other hand, if past experimental data can be utilized in Step 104, the designer uses the experimental data input device 2 to read in the experimental data for the past composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) and physical quantities related to the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) and object function  $OBJ$  set in Step 101 (Step 116).

[0054]

Next, in the same manner as in Step S107, the designer uses the material model calculation device 3 to allow the neural network to learn the composition parameters  $X_i$  ( $i = 1$  to  $N$ ) for the constituent components of the multi-component material as the input layer, and the physical quantities of the multi-component material as the output layer (Step 117).

[0055]

When the neural network has finished learning, the designer sets the total number of experiment runs  $n_h$  to 0 (Step 118) and then moves control to Step 108.

[0056]

Thereafter, the same processing as in the case in which past experimental data cannot be utilized in Step 104 is performed.

[0057]

Note that in the aforementioned embodiment, the material model was prepared using a neural network as the nonlinear predictive technique, but fuzzy or other nonlinear predictive techniques may also be used.

[0058]

In addition, in the aforementioned embodiment, the optimal composition of the multi-component material is generated directly, but it is also possible to obtain the grain size, grain size ratio or other even more abstract information regarding the constituent components of the multi-component material.

[0059]

#### **[Meritorious Effects of the Invention]**

As described above, with the multi-component material optimization analysis apparatus according to the present invention, a combination of: a material model calculation means based on nonlinear predictive techniques that is able to find interrelationships between composition parameters for three or more constituent components and a constraint condition and the physical quantities of the multi-component material, without making assumptions about the function type; and an optimization calculation means that uses optimization techniques based on the material model calculated by the material model calculation means to calculate the composition parameters for the constituent components of the multi-component material that are suited to the object is used to provide output of a proposed material optimization design. Thus, it has meritorious effects in that the relationships among composition parameters for three or more constituent components and a constraint condition and the physical quantities of the multi-component material can be easily found, and also the precision of the material model is good and it is possible to provide output of proposed material optimization designs that are valid.

[0060]

In addition, with the multi-component material optimization analysis method according to the present invention, a combination of: a material model calculation step based on nonlinear predictive techniques that is able to find interrelationships between composition parameters for three or more constituent components and a constraint condition and the physical quantities of the multi-component material, without making assumptions about the function type; and an optimization calculation step that uses optimization techniques based on the material model calculated by the material model calculation step to calculate the composition parameters for the constituent components of the multi-component material that are suited to the object is used to provide output of a proposed material optimization design. Thus, it has meritorious effects in that the relationships among composition parameters for three or more constituent components and a constraint condition and the physical quantities of the multi-component material can be easily found, and also the precision of the material model is good and it is possible to provide output of proposed material optimization designs that are valid.

#### **[Brief Explanation of the Drawings]**



[FIG. 1] This is a block diagram that shows the constitution of one embodiment of the multi-component material optimization analysis apparatus according to the present invention.

[FIG. 2] This is a schematic diagram used to describe the material model calculation device in FIG. 1.

[FIG. 3] This is a flowchart showing the procedure of the method for the optimization analysis of multi-component materials according to an embodiment of the present invention.

[FIG. 4] This is a flowchart illustrating the processing performed by the material model calculation device in FIG. 1.

[FIG. 5] This is a flowchart illustrating the processing performed by the optimization calculation device in FIG. 1.

**[Explanation of Symbols]**

- 1 Optimization item input device
- 2 Experimental data input device
- 3 Material model calculation device
- 4 Optimization calculation device
- 5 Optimization results output device
- 101 Step of setting the composition parameters, object function and maximum number of experiment runs
- 102 Step of setting the composition parameter range
- 103 Step of initializing counters
- 104 Step of determining the usability of past experimental data
- 105 Experiment planning step
- 106 Physical quantity experiment step
- 107 Neural network learning step
- 108 Optimization calculation step
- 109 Experiment run counter incrementing step
- 110 Step of determining whether or not the maximum number of experiment runs has been reached
- 111 Loop counter incrementing step
- 112 Step of resetting the composition parameter range
- 113 Optimal composition parameter output step
- 114 Step of determining the presence of the same composition
- 115 Physical quantity experiment and database registration step
- 116 Step of reading past composition parameters and physical quantities
- 117 Neural network learning step
- 118 Step of setting the total number of experiment runs to 0

$$\frac{dG}{dX_i} = \frac{G_i - G_o}{\Delta X_i} \dots \dots \dots (4)$$

FIG. 1

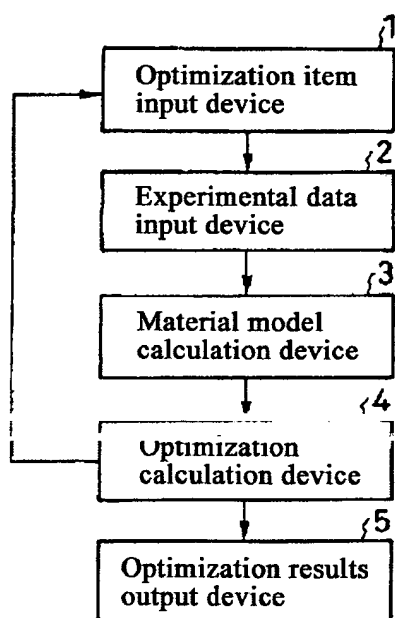


FIG. 2

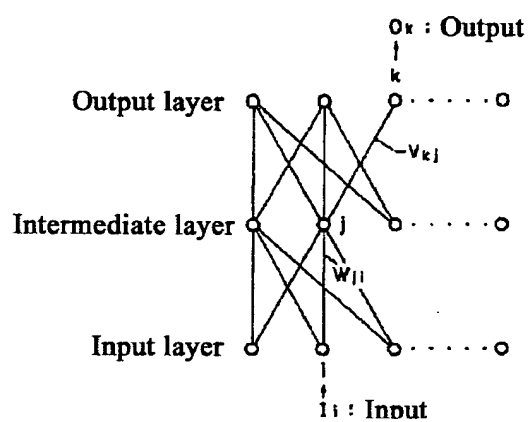


FIG. 3

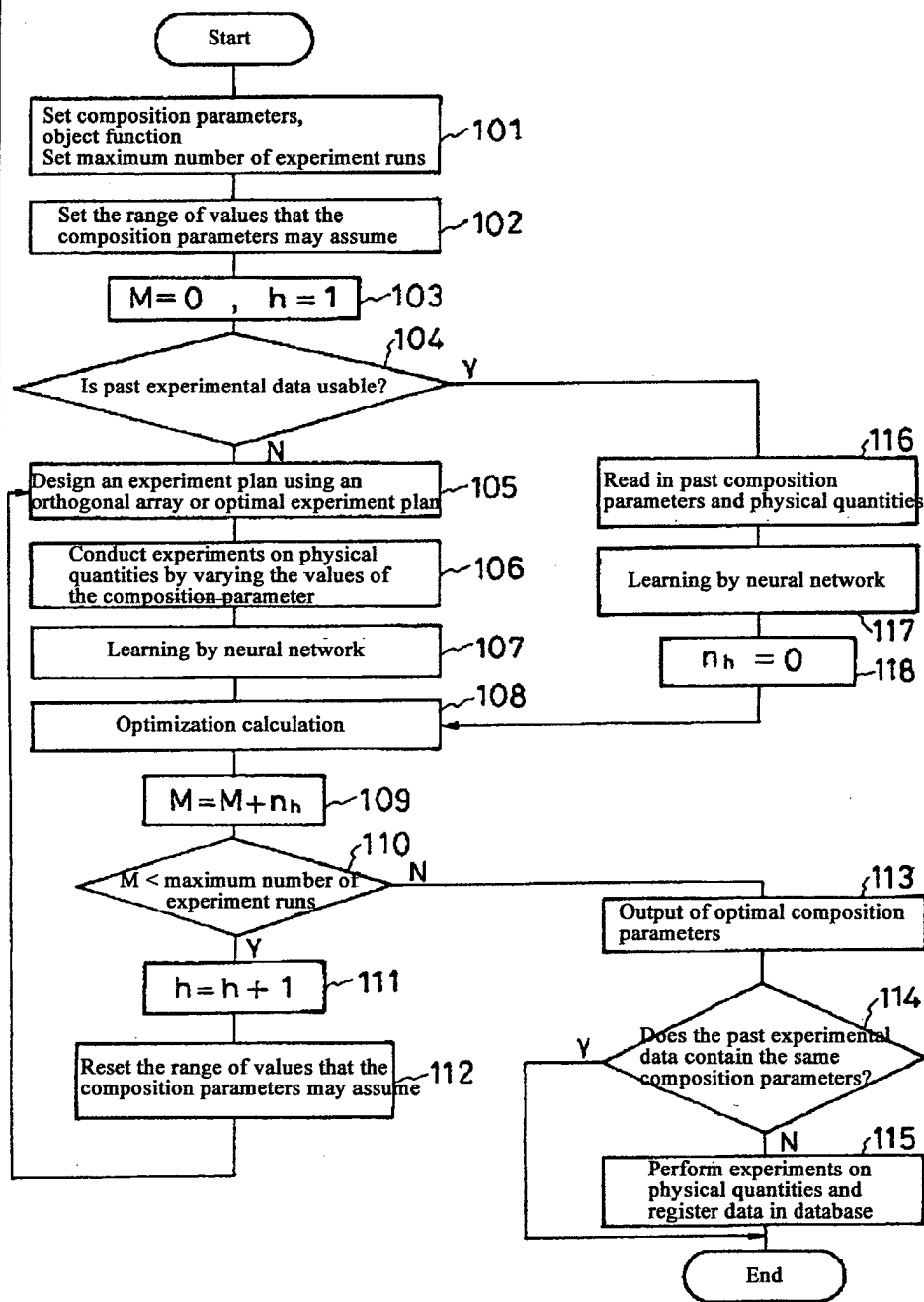


FIG. 4

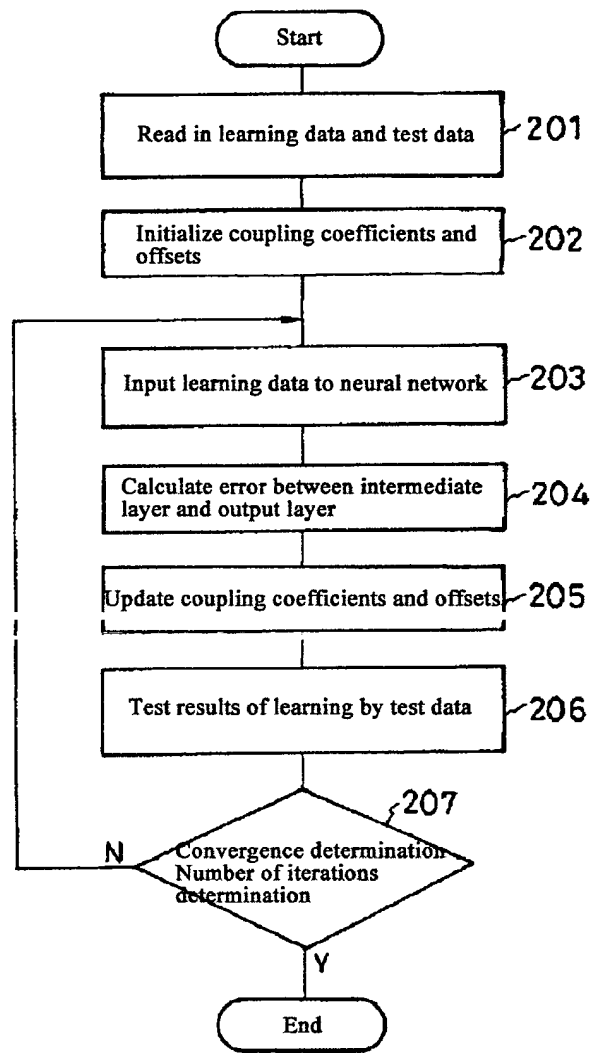
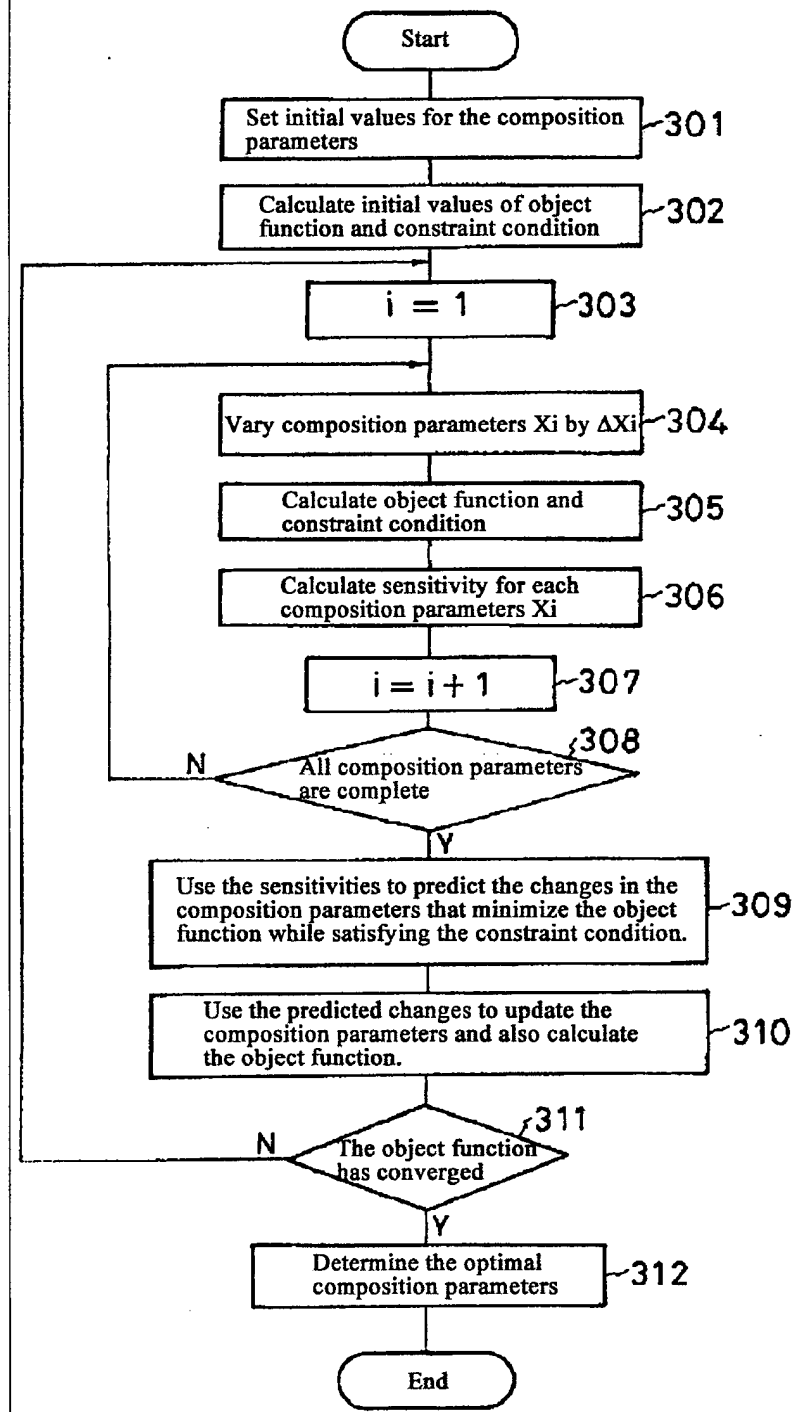


FIG. 5



This Page Blank (uspto)